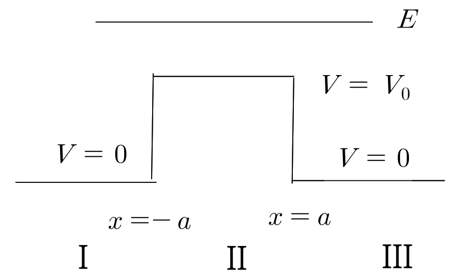
5.4 유한한 위치에너지 우물과 장벽 (Finite Potential Well/Barrier)

이 절에서는 앞에서 다룬 것보다 약간 더 계산이 복잡한 위치에너지의 경우를 생각해 보자. 먼저 위치에너지가 영보다 작은 네모난 우물 형태 위치에너지의 경우, 입자의 에너지가 영보다 커서 산란하는 경우와 입자의 에너지가 영보다 작아서 속박상태를 이루는 두 가지 경우를 생각할 수 있다. 위치에너지가 영보다 큰 네모난 장벽의 경우에는 네모난 우물을 거꾸로 뒤집은 상태에 해당하는데, 이 경우에는 입자의 에너지가 장벽보다 높은 경우와 장벽보다 낮은 경우의 산란을 생각할 수 있다. 여기서 특히 입자의 에너지가 위치에너지 장벽보다 낮은 경우 고전적으로는 통과가 불가능하지만, 양자역학적으로는 파동함수가 장벽을 투과하여 실제로 통과할 확률이 영이 아닌 양자투과(quantum tunneling) 현상을 일으킨다. 이제 차례로 이러한 각각의 경우에 대해 살펴보기로 하겠다.

- **네모난 장벽에서의 산란 ($0 < V_0 < E$)**



그림과 같이 위치에너지가 네모난 장벽 형태로 주어졌다고 하자:

$$V = \begin{cases} 0\,, & \text{for } x < -a,\ x > a \\ V_0\,, & \text{for } -a < x < a \end{cases} .$$

여기서 $V_0 > 0$ 이고, 입자의 에너지는 $V_0 < E$ 라고 가정하자. 이 경우 경계에서 위치에너지의 변화가 유한하므로 앞 절에서 살펴본 바와 같이 $x = -a$, $x = a$ 의 경계에서 파동함수의 값과 기울기가 연속적이어야 한다. 그러므로 $x < -a$ 의 영역을 영역 I, $-a < x < a$ 의 영역을 영역 II, $a < x$ 의 영역을 영역 III 이라고 하고 각 영역에서의 파동함수를 각각 $\psi_I\,, \psi_{II}\,, \psi_{III}$ 라고 하면, 이 파동함수들은 다음의 경계조건들을 만족하여야 한다.

$$\psi_I(x=-a) = \psi_{II}(x=-a), \quad \frac{d\psi_I}{dx}\Big|_{x=-a} = \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=-a} ,$$

$$\psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a), \quad \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=a} = \frac{d\psi_{III}}{dx}\Big|_{x=a} .$$

여기서 각 영역에서 해밀토니안이 다음과 같이 주어지므로,

$$H_I = H_{III} = \frac{p^2}{2m} \ , \quad H_{II} = \frac{p^2}{2m} + V_0 \ ,$$

슈뢰딩거 방정식으로부터 $\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2 > 0$, $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \equiv k_1^2 > 0$ 이라고 정의하면, 각 영역에서의 파동함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Psi_I = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}$$

$$\Psi_{II} = C\,e^{ik_1x} + D\,e^{-ik_1x}$$

$$\Psi_{III} = F\,e^{ikx}$$

여기에 경계조건들을 적용하면 다음과 같다.

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-ik_1 a} + De^{ik_1 a} \quad \cdots(1)$$

$$Ake^{-ika} - Bke^{ika} = Ck_1 e^{-ik_1 a} - Dk_1 e^{ik_1 a} \quad \cdots(2)$$

$$Ce^{ik_1 a} + De^{-ik_1 a} = Fe^{ika} \quad \cdots(3)$$

$$Ck_1 e^{ik_1 a} - Dk_1 e^{-ik_1 a} = Fke^{ika} \quad \cdots(4)$$

이제 C, D 를 소거하고 B, F 를 A 로 나타내기 위하여 다음을 생각해 보자.
먼저 (1)식에 k 를 곱하여 (2)식에 더하면 다음과 같고

$$2Ake^{-ika} = (k+k_1)Ce^{-ik_1 a} + (k-k_1)De^{ik_1 a} \quad \cdots(5)$$

(1)식에 k 를 곱하여 (2)식을 빼면 다음과 같다.

$$2Bke^{ika} = (k-k_1)Ce^{-ik_1 a} + (k+k_1)De^{ik_1 a} \quad \cdots(6)$$

다음으로 (3)식에 k 를 곱한 후 (4)식을 빼면 다음을 얻는다.

$$(k-k_1)Ce^{ik_1 a} + (k+k_1)De^{-ik_1 a} = 0$$

그러므로 C 는 다음과 같이 D 로 표현할 수 있다.

$$C = -\frac{k+k_1}{k-k_1} e^{-2ik_1 a} D \quad \cdots(7)$$

이제 반사계수와 투과계수를 구하여 보자.

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2, \quad R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

(7)식을 사용하여 C, D 를 소거할 수 있도록 (6)식을 (5)식으로 나누면

$$\frac{B}{A} e^{2ika} = \frac{(k-k_1)Ce^{-ik_1 a} + (k+k_1)De^{ik_1 a}}{(k+k_1)Ce^{-ik_1 a} + (k-k_1)De^{ik_1 a}}$$

이 되고 (7)식을 대입하면 다음과 같이 된다.

$$\frac{B}{A} e^{2ika} = \frac{-(k+k_1)e^{-3ik_1 a} + (k+k_1)e^{ik_1 a}}{-\frac{(k+k_1)^2}{(k-k_1)} e^{-3ik_1 a} + (k-k_1)e^{ik_1 a}}$$

$$= \frac{(k^2-k_1^2)e^{-2ik_1 a} - (k^2-k_1^2)e^{2ik_1 a}}{(k+k_1)^2 e^{-2ik_1 a} - (k-k_1)^2 e^{2ik_1 a}}$$

여기서 2a = L로 놓으면 $\frac{B}{A}$ 값은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{B}{A} = \frac{-(k^2-k_1^2)(e^{ik_1 L} - e^{-ik_1 L})}{(k+k_1)^2 e^{-ik_1 L} - (k-k_1)^2 e^{ik_1 L}} e^{-ikL}$$

$$= \frac{-2i(k^2-k_1^2)\sin k_1 L}{4kk_1 \cos k_1 L - 2i(k^2+k_1^2)\sin k_1 L} e^{-ikL}$$

그러므로 반사계수는 다음과 같다.

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(k^2-k_1^2)^2 \sin^2 k_1 L}{4k^2k_1^2 \cos^2 k_1 L + (k^2+k_1^2)^2 \sin^2 k_1 L}$$

여기서 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $k_1^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ 이다.

이제 투과계수를 구하기 위하여 (3)식을 (5)식으로 나누면,

$$\frac{Fe^{ika}}{2Ake^{-ika}} = \frac{Ce^{ik_1 a}+De^{-ik_1 a}}{(k+k_1)Ce^{-ik_1 a}+(k-k_1)De^{ik_1 a}}$$
$$= \frac{(k+k_1)-(k-k_1)}{(k+k_1)^2 e^{-2ik_1 a}-(k-k_1)^2 e^{2ik_1 a}}$$

즉, $\frac{F}{A} = \frac{4kk_1}{4kk_1 \cos k_1 L - 2i(k^2+k_1^2)\sin k_1 L} e^{-ikL}$ 이 된다.

그러므로 투과계수는 다음과 같다.

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{4k^2k_1^2}{4k^2k_1^2 \cos^2 k_1 L + (k^2+k_1^2)^2 \sin^2 k_1 L}$$

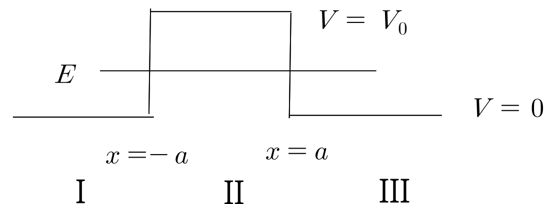
여기서 주목할 점은 $k_1 L = n\pi$, $n = 1,2,3,...$ 이 되는 경우 T가 1이 되어 전혀 장벽이 없는 것처럼 통과한다는 점이다. 불활성 기체에서 처음 관찰된 이러한 투과공명(transmission resonance) 현상은 램사우어-타운센드(Ramsauer-Townsend) 효과라고 불린다. 이러한 공명이 일어나는 조건 $k_1 L = \frac{2\pi}{\lambda_1} L = n\pi$ 은 $L = \frac{\lambda_1}{2} n$의 조건을 의미하므로 공명이 일어나는 경우의 드브로이 파는 정상파에 해당함을 의미한다.

한편, 위에서 우리는 반사 및 투과 계수의 합이 1이 됨을 확인할 수 있다.

$$R+T = \left|\frac{B}{A}\right|^2 + \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{(k^2-k_1^2)^2 \sin^2 k_1 L + 4k^2k_1^2}{4k^2k_1^2 \cos^2 k_1 L + (k^2+k_1^2)^2 \sin^2 k_1 L} = 1$$

- **네모난 장벽에서의 투과** ($0 < E < V_0$)

(Tunneling of finite rectangular barrier)



이제 입자의 에너지가 장벽의 위치에너지 보다 낮은 경우($E < V_0$)를 생각해보자.
이 경우 $x < -a$의 영역을 영역I, $-a < x < a$의 영역을 영역II, $a < x$의 영역을 영역III 이라고 하고 각 영역에서의 파동함수를 각각 $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ 라고 하면, 이 파동함수들은 네모난 장벽에서의 산란과 동일한 경계조건들을 만족한다.

$$\psi_I(x=-a) = \psi_{II}(x=-a), \quad \frac{d\psi_I}{dx}\Big|_{x=-a} = \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=-a},$$

$$\psi_{II}(x=a)=\psi_{III}(x=a), \quad \frac{d\psi_{II}}{dx}|_{x=a}=\frac{d\psi_{III}}{dx}|_{x=a} \ .$$

각 영역에서 해밀토니안은 다음과 같이 주어지므로,

$$H_I=H_{III}=\frac{p^2}{2m} \ , \quad H_{II}=\frac{p^2}{2m}+V_0 \ ,$$

이 경우는 $(E-V_0)<0$ 이므로 $\frac{2mE}{\hbar^2}\equiv k^2>0$, $\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\equiv\kappa^2>0$ 이라고 정의하면, 각 영역에서의 파동함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_I=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

$$\psi_{II}=Ce^{\kappa x}+De^{-\kappa x}$$

$$\psi_{III}=Fe^{ikx}$$

여기에 경계조건들을 적용하면 다음과 같다.

$$Ae^{-ika}+Be^{ika}=Ce^{-\kappa a}+De^{\kappa a} \quad \cdots(1)$$

$$Aike^{-ika}-Bike^{ika}=C\kappa e^{-\kappa a}-D\kappa e^{\kappa a} \quad \cdots(2)$$

$$Ce^{\kappa a}+De^{-\kappa a}=Fe^{ika} \quad \cdots(3)$$

$$C\kappa e^{\kappa a}-D\kappa e^{-\kappa a}=Fike^{ika} \quad \cdots(4)$$

여기서 주목할 점은 앞서 분석한 네모난 장벽에서의 산란($V_0<E$)의 경우에서 k_1 을 $-i\kappa$ 로 대체하면 위의($E<V_0$) 경계조건식들이 얻어진다는 것이다.

그러므로 우리는 앞에 얻은 결과에 k_1 을 $-i\kappa$ 로 대체하여 바로 이 경우의 결과를 얻을 수 있다. 이제 $\sin(-i\kappa L)=-i\sinh\kappa L$, $\cos(-i\kappa L)=\cosh\kappa L$ 의 관계를 사용하면 우리는 다음 결과를 얻는다.

즉,

$$\frac{B}{A}=\frac{2(k^2+\kappa^2)\sinh\kappa L}{4ik\kappa\cosh\kappa L+2(k^2-\kappa^2)\sinh\kappa L}\,e^{-ikL}$$

로부터 반사계수는 다음과 같다.

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L+(k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}$$

여기서 $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$, $\kappa^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$ 이다.

마찬가지로

$$\frac{F}{A}=\frac{4ik\kappa}{4ik\kappa\cosh\kappa L+2(k^2-\kappa^2)\sinh\kappa L}\,e^{-ikL}$$

그러므로 투과계수는 다음과 같다.

$$T=\left|\frac{F}{A}\right|^2=\frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L+(k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}$$

이상에서 우리는 반사 및 투과 계수의 합이 1이 됨을 확인할 수 있다.

$$R+T=\left|\frac{B}{A}\right|^2+\left|\frac{F}{A}\right|^2=\frac{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L+4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L+(k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}=1$$

여기서 $k^2+\kappa^2=\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$ 의 표현이 간단하므로 우리는 투과계수를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$T=\frac{1}{1+\left(\dfrac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\right)^2\sinh^2\kappa L}$$

이상의 결과는 우리가 앞에서처럼 직접 경계조건식들을 풀어서 확인할 수 있다.
이제 C, D 를 소거하고 B, F 를 A 로 나타내기 위하여 다음을 생각해 보자.
먼저 (1)식에 ik 를 곱하여 (2)식에 더하면 다음과 같고

$$2Ake^{-ika}=(ik+\kappa)Ce^{-\kappa a}+(ik-\kappa)De^{\kappa a} \qquad \cdots (5)$$

(1)식에 ik 를 곱하여 (2)식을 빼면 다음과 같다.

$$2Bke^{ika}=(ik-\kappa)Ce^{-\kappa a}+(ik+\kappa)De^{\kappa a} \qquad \cdots (6)$$

다음으로 (3)식에 ik 를 곱한 후 (4)식을 빼면 다음을 얻는다.

$$(ik-\kappa)Ce^{\kappa a}+(ik+\kappa)De^{-\kappa a}=0$$

그러므로 C 는 다음과 같이 D 로 표현할 수 있다.

$$C=-\frac{ik+\kappa}{ik-\kappa}e^{-2\kappa a}D \qquad \cdots (7)$$

이제 반사계수와 투과계수를 구하여 보자.

$$T=\left|\frac{F}{A}\right|^2,\ \ R=\left|\frac{B}{A}\right|^2$$

(7)식을 사용하여 C, D 를 소거할 수 있도록 (6)식을 (5)식으로 나누면

$$\frac{B}{A}e^{2ika}=\frac{(ik-\kappa)Ce^{-\kappa a}+(ik+\kappa)De^{\kappa a}}{(ik+\kappa)Ce^{-\kappa a}+(ik-\kappa)De^{\kappa a}}$$

이 되고 (7)식을 대입하면 다음과 같이 된다.

$$\frac{B}{A}e^{2ika}=\frac{-(ik+\kappa)e^{-3\kappa a}+(ik+\kappa)e^{\kappa a}}{-\dfrac{(ik+\kappa)^2}{(ik-\kappa)}e^{-3\kappa a}+(ik-\kappa)e^{\kappa a}}$$

$$=\frac{-(k^2+\kappa^2)e^{-2\kappa a}+(k^2+\kappa^2)e^{2\kappa a}}{(ik+\kappa)^2e^{-2\kappa a}-(ik-\kappa)^2e^{2\kappa a}}$$

여기서 2a = L로 놓으면 $\dfrac{B}{A}$ 값은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{B}{A}=\frac{-(k^2+\kappa^2)[\cosh\kappa L-\sinh\kappa L]+(k^2+\kappa^2)[\cosh\kappa L+\sinh\kappa L]}{(ik+\kappa)^2[\cosh\kappa L-\sinh\kappa L]-(ik-\kappa)^2[\cosh\kappa L+\sinh\kappa L]}e^{-ikL}$$

$$=\frac{2(k^2+\kappa^2)\sinh\kappa L}{4ik\kappa\cosh\kappa L+2(k^2-\kappa^2)\sinh\kappa L}e^{-ikL}$$

그러므로 반사계수는 다음과 같다.

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L+(k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}$$

여기서 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$, $\kappa^2 = \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$ 이다.

이제 투과계수를 구하기 위하여 (3)식을 (5)식으로 나누면,

$$\frac{Fe^{ika}}{2Aike^{-ika}} = \frac{Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a}}{(ik+\kappa)Ce^{-\kappa a} + (ik-\kappa)De^{\kappa a}}$$

$$= \frac{-\dfrac{ik+\kappa}{ik-\kappa}e^{-\kappa a} + e^{-\kappa a}}{-\dfrac{(ik+\kappa)^2}{(ik-\kappa)}e^{-3\kappa a} + (ik-\kappa)e^{\kappa a}}$$

$$= \frac{(ik+\kappa)-(ik-\kappa)}{(ik+\kappa)^2 e^{-2\kappa a} - (ik-\kappa)^2 e^{2\kappa a}}$$

즉,

$$\frac{F}{A} = \frac{4ik\kappa}{(ik+\kappa)^2 e^{-\kappa L} - (ik-\kappa)^2 e^{\kappa L}}\, e^{-ikL}$$

$$= \frac{4ikk_1}{4ik\kappa\cosh\kappa L - 2(k^2-\kappa^2)\sinh\kappa L}\, e^{-ikL}$$

그러므로 투과계수는 다음과 같다.

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L + (k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}$$

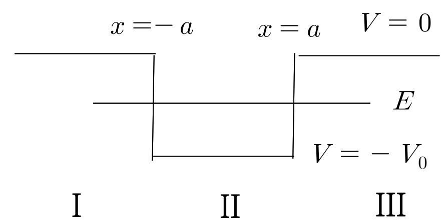
이상에서 우리는 반사 및 투과 계수의 합이 1이 됨을 확인할 수 있다.

$$R + T = \left|\frac{B}{A}\right|^2 + \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L + 4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L + (k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L} = 1$$

• 네모난 우물(Square Well)에서의 속박상태 ($-V_0 < E < 0$)

이제 그림과 같이 위치에너지가 우물형태로 주어졌다고 하자:

$$V = \begin{cases} 0, & \text{for } x < -a,\ x > a \\ -V_0, & \text{for } -a < x < a \end{cases}.$$



[그림5.6] 네모난 우물

여기서 $V_0 > 0$ 이고, 입자의 에너지는 $-V_0 < E < 0$ 라고 가정하자. 이 경우 위치에너지와 입자의 에너지가 같아지는 경계에서 위치에너지의 변화가 유한하므로 앞 절에서 살펴본 바와 같이 $x = -a$, $x = a$ 의 경계에서 파동함수의 값과 기울기가 연속적이어야 한다. 그러므로 $x < -a$의 영역을 영역 I, $-a < x < a$의 영역을 영역 II, $a < x$의 영역을 영역 III 이라고 하고 각 영역에서의 파동함수를 각각 $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ 라고 하면, 이 파동함수들은 다음의 경계조건들을 만족하여야 한다.

$$\psi_I(x=-a)=\psi_{II}(x=-a),\quad \frac{d\psi_I}{dx}\Big|_{x=-a}=\frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=-a}\ ,$$

$$\psi_{II}(x=a)=\psi_{III}(x=a),\quad \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=a}=\frac{d\psi_{III}}{dx}\Big|_{x=a}\ .$$

여기서 각 영역에서 해밀토니안이 다음과 같이 주어지므로,

$$H_I=H_{III}=\frac{p^2}{2m}\ ,\quad H_{II}=\frac{p^2}{2m}-V_0\ ,$$

슈뢰딩거 방정식으로부터 $-\frac{2mE}{\hbar^2}\equiv\kappa^2>0$, $\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}\equiv k_1^2>0$ 이라고 정의하면, $x=\pm\infty$ 에서 파동함수가 발산하지 z_1 가야 하므로 각 영역에서의 파동함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$\psi_I=Ae^{\kappa x}$

$\psi_{II}=B\cos k_1x+C\sin k_1x$

$\psi_{III}=D\,e^{-\kappa x}$

여기서 A, B, C, D 는 상수이다.

그러면, 위의 경계조건에서 우리는 다음 관계식을 얻는다.

$Ae^{-\kappa a}=B\cos(-k_1a)+C\sin(-k_1a)=B\cos(k_1a)-C\sin(k_1a)$ ----- (1)

$\kappa A\,e^{-\kappa a}=-k_1B\sin(-k_1a)+k_1C\cos(-k_1a)=k_1B\sin(k_1a)+k_1C\cos(k_1a)$ --- (2)

$B\cos(k_1a)+C\sin(k_1a)=De^{-\kappa a}$ ----- (3)

$-k_1B\sin(k_1a)+k_1C\cos(k_1a)=-\kappa\,D\,e^{-\kappa a}$ ----- (4)

이제 (1)식과 (3)식을 더하면,

$(A+D)e^{-\kappa a}=2B\cos(k_1a)$ ----- (5)

이 되고, (2)식에서 (4)식을 빼면 다음을 얻는다.

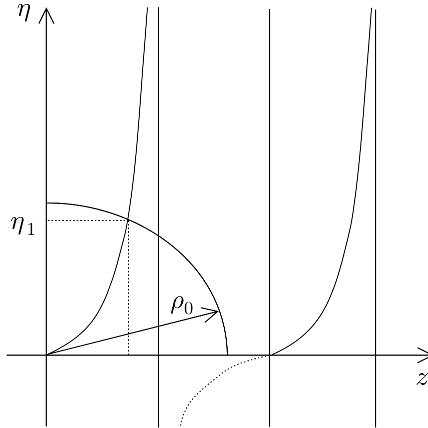
$\kappa\,e^{-\kappa a}(A+D)=2k_1B\sin(k_1a)$ ------ (6)

위의 (5-6)식에서 우리는 $B\neq0$ (파동함수가 우함수)인 경우 $\kappa=k_1\tan(k_1a)$ 의 관계식이 만족됨을 알 수 있다.

그런데 여기서 $z\equiv k_1a=\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}a$, $\rho_0\equiv\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$ 로 놓으면 $\kappa^2+k_1^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}$ 로부터 $(\kappa a)^2+z^2=\rho_0^2$ 이 만족되어야 함을 알 수 있다. 한편 앞에서 $\kappa^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$ 로 주어졌으므로 $\kappa a\equiv\eta$ 로 놓으면 우리는 다음의 두 관계식을 만족하는 z,η 로부터 에너지 E 를 구할 수 있다.

$$\eta=z\tan z\ ,\qquad \eta^2+z^2=\rho_0^2$$

아래 그림에서 두 식을 만족하는 첫 번째 z 값에서의 η 값을 η_1 이라고 하면, 바닥상태의 에너지 E_1 은 다음과 같이 주어진다. 즉, $\eta_1^2=-\frac{2mE_1}{\hbar^2}a^2$ 으로부터 $E_1=-\frac{\hbar^2\eta_1^2}{2ma^2}$ 이다.



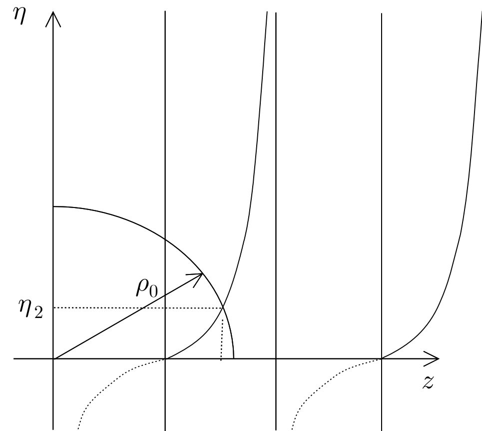
다음으로 $C \neq 0$ (파동함수가 기함수)인 경우를 생각해보자.
경계조건식들에서 우리는 다음을 얻는다.
이제 (1)식에서 (3)식을 빼고, (2)식에 (4)식을 더하면
각각 다음 식을 얻을 수 있다.

$$(A-D)e^{-\kappa a} = -2C\sin(k_1 a)$$

$$(A-D)\kappa\, e^{-\kappa a} = 2k_1 C\cos(k_1 a)$$

위 두 식으로부터 우리는 다음 결과를 얻는다.

$$\kappa = -k_1 \cot(k_1 a)$$



앞의 경우와 마찬가지로 z, η 를 정의하면
우리는 다음 관계식을 얻는다.

$$\eta = -z\cot z$$

한편 z, η 는 위에서와 동일하게

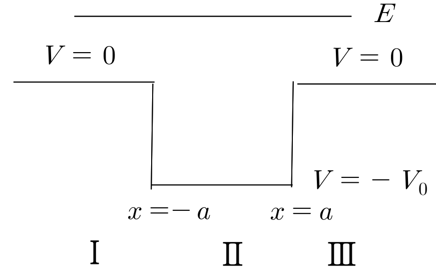
$$\eta^2 + z^2 = \rho_0^2$$

의 관계식도 만족하므로 그림에서 구해진 η_2 값으로부터 첫 번째 들뜬 상태의 에너지 E_2 를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$E_2 = -\frac{\hbar^2 \eta_2^2}{2ma^2}$$

참고로 여기에서 항상 $\eta_1 > \eta_2$ 이므로 $E_1 < E_2$ 가 되고, $\rho_0 \equiv \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$ 의 값이 $\frac{\pi}{2}$ 보다 작을 경우는 파동함수가 우함수인 첫 번째 경우에는 항상 속박상태가 존재하지만, 파동함수가 기함수인 두 번째 경우에는 속박상태의 해가 존재하지 않음을 주목하자.

• **네모난 우물에서의 산란 ($0 < E$)**



네모난 우물에서의 산란은 네모난 장벽에서의 산란 ($0 < V_0 < E$)과 동일하게 구할 수 있다. 그림과 같이 위치에너지가 네모난 우물 형태로 주어졌다고 하자:

$$V = \begin{cases} 0\,, & \text{for } x < -a,\ x > a \\ -V_0\,, & \text{for } -a < x < a \end{cases} .$$

여기서 $V_0 > 0$ 이고, 입자의 에너지는 $-V_0 < E$ 라고 가정하자. 이 경우 경계에서 위치에너지의 변화가 유한하므로 앞 절에서 살펴본 바와 같이 $x = -a$, $x = a$ 의 경계에서 파동함수의 값과 기울기가 연속적이어야 한다. 그러므로 $x < -a$ 의 영역을 영역 I, $-a < x < a$ 의 영역을 영역 II, $a < x$ 의 영역을 영역 III 이라고 하고 각 영역에서의 파동함수를 각각 $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ 라고 하면, 이 파동함수들은 다음의 경계조건들을 만족하여야 한다.

$$\psi_I(x=-a) = \psi_{II}(x=-a), \quad \frac{d\psi_I}{dx}\Big|_{x=-a} = \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=-a} ,$$

$$\psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a), \quad \frac{d\psi_{II}}{dx}\Big|_{x=a} = \frac{d\psi_{III}}{dx}\Big|_{x=a} .$$

여기서 각 영역에서 해밀토니안이 다음과 같이 주어지므로,

$$H_I = H_{III} = \frac{p^2}{2m} , \quad H_{II} = \frac{p^2}{2m} - V_0 ,$$

슈뢰딩거 방정식으로부터 $\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2 > 0$, $\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \equiv k_1^2 > 0$ 이라고 정의하면, 각 영역에서의 파동함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\Psi_{II} = C e^{ik_1 x} + D e^{-ik_1 x}$$

$$\Psi_{III} = F e^{ikx}$$

여기에 경계조건들을 적용하면 다음과 같다.

$$A e^{-ika} + B e^{ika} = C e^{-ik_1 a} + D e^{ik_1 a} \quad \cdots (1)$$

$$Ake^{-ika} - Bke^{ika} = Ck_1 e^{-ik_1 a} - Dk_1 e^{ik_1 a} \quad \cdots (2)$$

$$C e^{ik_1 a} + De^{-ik_1 a} = F e^{ika} \quad \cdots (3)$$

$$Ck_1 e^{ik_1 a} - Dk_1 e^{-ik_1 a} = Fke^{ika} \quad \cdots (4)$$

이제 C, D 를 소거하고 B, F 를 A 로 나타내기 위하여 다음을 생각해 보자.
먼저 (1)식에 k 를 곱하여 (2)식에 더하면 다음과 같고

$$2Ake^{-ika} = (k+k_1)Ce^{-ik_1 a} + (k-k_1)De^{ik_1 a} \quad \cdots (5)$$

(1)식에 k 를 곱하여 (2)식을 빼면 다음과 같다.

$$2Bke^{ika} = (k-k_1)Ce^{-ik_1a} + (k+k_1)De^{ik_1a} \qquad \cdots(6)$$

다음으로 (3)식에 k 를 곱한 후 (4)식을 빼면 다음을 얻는다.

$$(k-k_1)Ce^{ik_1a} + (k+k_1)De^{-ik_1a} = 0$$

그러므로 C 는 다음과 같이 D 로 표현할 수 있다.

$$C = -\frac{k+k_1}{k-k_1}e^{-2ik_1a}D \qquad \cdots(7)$$

이제 반사계수와 투과계수를 구하여 보자.

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2, \quad R = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

(7)식을 사용하여 C, D 를 소거할 수 있도록 (6)식을 (5)식으로 나누면

$$\frac{B}{A}e^{2ika} = \frac{(k-k_1)Ce^{-ik_1a} + (k+k_1)De^{ik_1a}}{(k+k_1)Ce^{-ik_1a} + (k-k_1)De^{ik_1a}}$$

이 되고 (7)식을 대입하면 다음과 같이 된다.

$$\frac{B}{A}e^{2ika} = \frac{-(k+k_1)e^{-3ik_1a} + (k+k_1)e^{ik_1a}}{-\frac{(k+k_1)^2}{(k-k_1)}e^{-3ik_1a} + (k-k_1)e^{ik_1a}}$$

$$= \frac{(k^2-k_1^2)e^{-2ik_1a} - (k^2-k_1^2)e^{2ik_1a}}{(k+k_1)^2e^{-2ik_1a} - (k-k_1)^2e^{2ik_1a}}$$

여기서 2a = L로 놓으면 $\frac{B}{A}$ 값은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{B}{A} = \frac{-(k^2-k_1^2)(e^{ik_1L} - e^{-ik_1L})}{(k+k_1)^2e^{-ik_1L} - (k-k_1)^2e^{ik_1L}}e^{-ikL}$$

$$= \frac{-2i(k^2-k_1^2)\sin k_1L}{4kk_1\cos k_1L - 2i(k^2+k_1^2)\sin k_1L}e^{-ikL}$$

그러므로 반사계수는 다음과 같다.

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{(k^2-k_1^2)^2\sin^2 k_1L}{4k^2k_1^2\cos^2 k_1L + (k^2+k_1^2)^2\sin^2 k_1L}$$

여기서 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $k_1^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ 이다.

이제 투과계수를 구하기 위하여 (3)식을 (5)식으로 나누면 다음 식을 얻는다.

$$\frac{Fe^{ika}}{2Ake^{-ika}} = \frac{Ce^{ik_1a} + De^{-ik_1a}}{(k+k_1)Ce^{-ik_1a} + (k-k_1)De^{ik_1a}}$$

$$= \frac{(k+k_1) - (k-k_1)}{(k+k_1)^2e^{-2ik_1a} - (k-k_1)^2e^{2ik_1a}}$$

즉,

$$\frac{F}{A} = \frac{4kk_1}{4kk_1\cos k_1L - 2i(k^2+k_1^2)\sin k_1L} e^{-ikL}$$ 이 되어 투과계수는 다음과 같다.

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{4k^2k_1^2}{4k^2k_1^2\cos^2 k_1L + (k^2+k_1^2)^2\sin^2 k_1L}$$

여기에서도 네모난 장벽에서의 산란과 마찬가지로 $k_1L = n\pi,\ \ n = 1,2,3,...$ 이 되는 경우 투과계수 T 가 1이 되어 투과공명 현상인 램사우어-타운센드 효과가 일어남을 알 수 있다.

한편, 이 경우에도 반사 및 투과 계수의 합이 1이 됨을 확인할 수 있다.

$$R + T = \left|\frac{B}{A}\right|^2 + \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{(k^2-k_1^2)^2\sin^2 k_1L + 4k^2k_1^2}{4k^2k_1^2\cos^2 k_1L + (k^2+k_1^2)^2\sin^2 k_1L} = 1$$